

東大 理

宮下 精二

相互作用の競合（フラストレーション）のために系の秩序状態にバラエティが現れ、またフラストレーションのない場合には見られなかった相転移が起こることが知られてきている。フラストレーションの効果は Ising スピン系において系の巨視的な縮退を生じさせるなど最も顕著に現れ、その相転移への影響は非常に詳しく調べられており多くの成果が報告されてきている¹⁻⁵⁾。連続スピン系、つまり XY 系やハイゼンベルク系等においてはスピンの自由度が大きいためフラストレーションによっても系の巨視的な縮退は生じないが、その競合の結果系の実効的な秩序変数の対称性がフラストレーションのない場合と異なり種々のおもしろい現象が起こることがわかってきた⁶⁻¹⁸⁾。ここでは連続スピン系の三角格子反強磁性体 (Anti-Ferromagnets on the Triangular Lattice AFT) での相転移の性質をスピン系の対称性、実効的な系の対称性を考察しながら報告する。

ここで考えるモデルハミルトニアンは次の2つのタイプのものである：

$$\mathcal{H}_A = \sum_{\langle i,j \rangle} [J_{xy}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_z S_i^z S_j^z] - H_z \sum_i S_i^z \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_D = \sum_{\langle i,j \rangle} J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - D \sum_i (S_i^z)^2 - H_z \sum_i S_i^z \quad (2)$$

ここで(1)は異方的カップリング型（A型：異方性は $A = J_z/J_{xy}$ で表す）であり(2)は単イオン異方性（D型）である。これら2つの型の違いはこれまで特に真剣に取り扱われてこなかったが基底状態の縮退の様子などで違いがある場合があることもわかった。ここでは主に最近接相互作用のみの場合でかつ古典スピン系を中心に報告するが第二近接相互作用や量子効果の影響についても少し触れたい。スピン系の対称性のタイプとしては次のものを考える。

- | | |
|---|--------------------------------------|
| i) XY 模型 ⁶⁻⁹⁾ | $A = 0$ or $D = -\infty$ |
| ii) XY-like Heisenberg 模型 ¹¹⁾ | $0 < A < 1$ or $D < 0$ |
| iii) Heisenberg 模型 ¹⁰⁾ | $A = 1$ or $D = 0$ |
| iv) Ising-like Heisenberg 模型 ¹¹⁾ | $1 < A < \infty$ or $0 < D < \infty$ |
| v) Ising 模型 ^{11, 14)} | $A = \infty$ or $D = \infty$ |

それぞれの場合の基底状態のスピン配位をそれぞれ図1に示す。ここでわかるようにこれらの系の秩序変数は三角格子の各 sublattice の3つのスピンからなる。これらの秩序状態を記述する量として次のカイラリティなる量を導入した⁷⁾： $\vec{\kappa} = \frac{2}{3\sqrt{3}}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \times \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \times \vec{S}_1)$

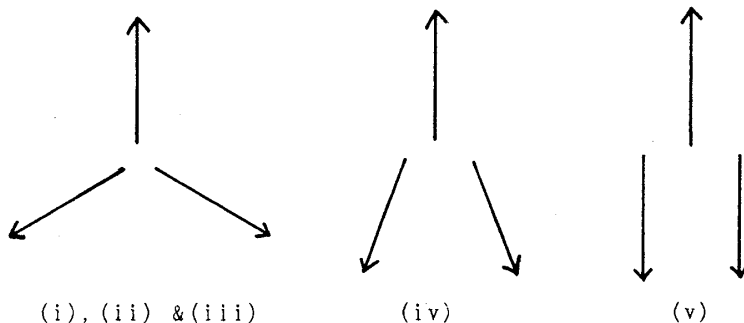


図1 (i), (ii) & (iii)

(iv)

(v)

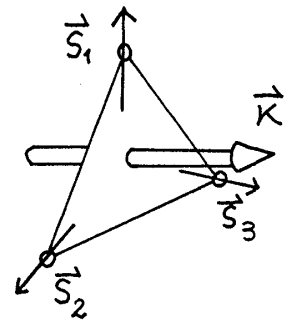


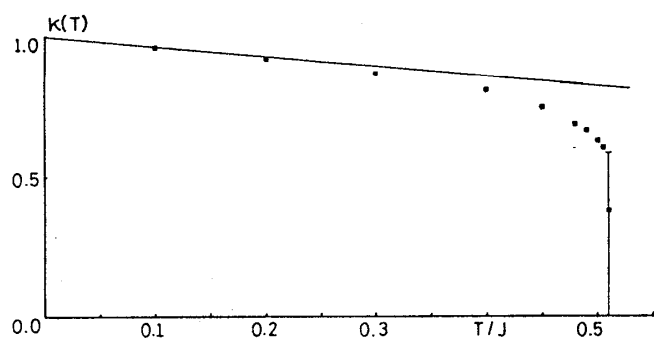
図2 カイラリティ

これは図2に示すように3つのスピンの作る面を貫くベクトルであり、AFTの秩序状態を記述するのに便利な量であることがわかる。

これらの量を用いて上述のスピンの対称性のそれぞれの場合の相転移の様子をみてみよう。

(I) XY模型及びXY-like Heisenberg模型⁶⁻⁹⁾

この場合にはスピンはXY面内にあり上述のカイラリティは軸性スカラー量となり実効的なIsingスピン系となる。このIsingスピンの自由度に伴いこの系では比熱が対数的に発散し、また自発的対称性の破れ $\langle \kappa \rangle$ も観測された(図3)。これらのデータからfinite-size スケーリングなどの解析を用いて相転移点 T_c を求めると $T_c = 0.513$ が得られた。フラストレーションのために連続スピン系においてこのように実効的な離散自由度が存在するかとはVillainによって指摘されており、今の場合のカイラリティもその一つの例と考えられる。このような離散的な自由度の自発的対称性の破れを実際に観測したものとしては今の例が初めてのものと思われる。このカイラリティの対称性の破れは別のみかたでは相互作用のFourier変換 $J(\vec{k})$ の2つのminima $\pm K$ 点($\pm 4\pi/3, 0$)の選択と考えることができる。選択された一つのモードのまわりにどの程度スピンがオーダーしているかはそのモードのまわりでハミルトニアンを調和近似することで調べられる。高次の項の繰込みのためハミルトニアンは実効的に $\mathcal{H} = J_{\text{eff}}(T) \sum_k \theta_k \theta_{-k}$ となる。この $J_{\text{eff}}(T)$ はスティフネス定数^{6,12)}と呼ばれるものでその温度変化は図4のようになる。これは強磁性XY模型のそれと酷似しており(強磁性の場合 minimumはK点のかわりに(0,0)にある)スピン配位の秩序状態はKosterlitz-Thouless転移¹²⁾のそれに非常に近いものと考えられる。スピン配位がKT転移を起こすと考えればその転移点 T_{KT} は $J_{\text{eff}}(T_{KT})/k_B T_{KT} = 2/\pi$ で与えられ図4の実線とデータの交点から T_{KT} が求まる。このようにして $T_{KT} = 0.502$ が得られた。これは前出の T_c よりわずかに下になる。もちろんこれらの転移点の評価はモンテカルロの精度ぎりぎりのところであり、また原理的にも $T_{KT}(5)$ のクライテリオンは今の場合根拠がうすいこともあり $T_c > T_{KT}$ が見つかったということとはできない。しかしながら上述の対称性の議論からしても $T_c > T_{KT}$ である可能性はあり、この機構で起こる逐次相転移は興味深いものである。この点を明らかにするため次のモデルを考えた。今、 T_c を決めているのはカイラリティドメイン壁のエネルギー $\Delta E = E(\uparrow\downarrow) - E(\uparrow\uparrow)$ 、つまり局所的なエネルギーギャップであり、また T_{KT} を決めているのは長波長のスティフネス定数 $\tilde{J}$ 、つまり今の場合は $\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} V(\theta_i - \theta_j)$ とすると $\tilde{J} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} V(\theta) \Big|_{\theta=0}$ である。この2



自発的対称性の破れ $\langle \kappa \rangle$

図3

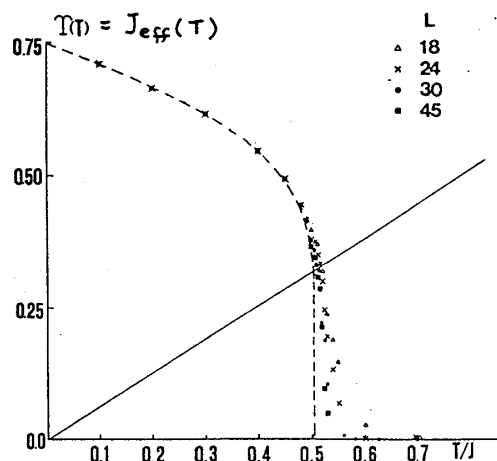


図4 スティフネス定数

つの転移点を引き離すためには ΔE を大きくし $\tilde{J}$ を小さくすればよい。そこで図5のような相互作用の形を考えれば $T_c \rightarrow$ 大、 $T_{KT} \rightarrow$ 小となることが期待できる。実際 T_c は V_0 のオーダーの下限を持つことがパイエルの議論から示すことができる。しかし T_{KT} の評価はむづかしく今のところ厳密に扱うことはできないが、次のもっともらしい3つの仮定を認めると T_{KT} は V_0 に無関係なある T_{KT} より下にあることがいえる：

- 1) $V_0 \rightarrow \infty$ で長波長のゆらぎは調和的になる：

$$\langle (\theta_0 - \theta_r)^2 \rangle \propto \log r,$$

$$\text{or } \langle \cos(\theta_0 - \theta_r) \rangle \sim r^{-2(T)}$$
- 2) V_0 を大きくすると $\eta(T)$ は小さくなる。
- 3) V_0 が有限で θ に vortex のゆらぎが許されるとその vortex の対形成に関して KT 転移が起こる：

$$\eta(T_{KT}) = 1/4.$$

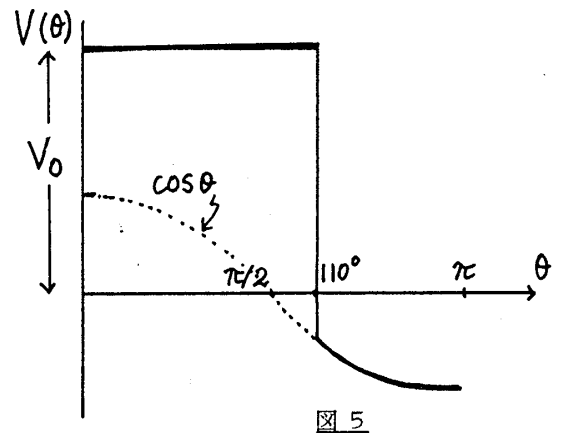


図5

また逆に sublattice間を結ぶ相互作用とかフラストレーションを弱める相互作用などを付加した場合にはカイラリティ秩序がなくても sublatticeスピン秩序が成長でき $T_c < T_{KT}$ となることも可能である。しかしながら今の場合には $T_c < T_{KT}$ は無理と考えられる。

(I I) Heisenberg模型¹⁰⁾

この場合カイラリティはもとのスピンと同じ3次元ベクトルになる。強磁性の2次元Heisenberg模型は有限温度で相転移を起こさないことが知られており、今の場合もカイラリティ自身は秩序変数になれない。しかしながらAFTの場合秩序状態は図1にあるように120°構造であり強磁性の場合のように1つのベクトルで表されるものとは質的に異なる。このAFTの場合の局所的な秩序変数は2つのベクトル、たとえば $\vec{n}$ と $\vec{S}_1$ 、によって特徴づけられトポロジカルには3次元の剛体回転と同型である。これは³Heのdipole-locked A相の秩序変数の場合などに見られるものだが今までスピン系には見られなかったものである。この対称性の秩序変数をもつ系にはある種の点欠陥があることが知られており¹³⁾その点欠陥の有無に関するKT的な転移の存在がモンテカルロシミュレーションによってみいだされている。この転移はまさに新しいタイプの相転移ということが出来る興味深いものである。詳しくは川村氏の報告を参照されたい。

(I I I) Ising-like Heisenberg模型¹¹⁾

普通の強磁性体ではIsing-like Heisenberg系はIsing系と同じユニバーサリティクラスであるが、今の場合図1で見えるように秩序変数がやはり2つのベクトルで指定されることから一軸的な秩序変数を持つIsing系とは異なる。図6にこの系の比熱を示す。この図に見られるようにこの系は2つの逐次的な相転移を示す。それぞれの転移はスピンのz-成分、xy-成分に関するものであることがsublattice上でのスピン秩序の振舞からわかる。これら2つの転移の異方性依存性を図7に示す。 $T_{N1} < T < T_{N2}$ でのスピン配位は一軸的(collinear)なものであり $S_j^z \sim \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_j + \phi)$, $\vec{k} = (\pm 3\pi/4, 0)$ で表されるものと考えられる。ここで位相 ϕ は

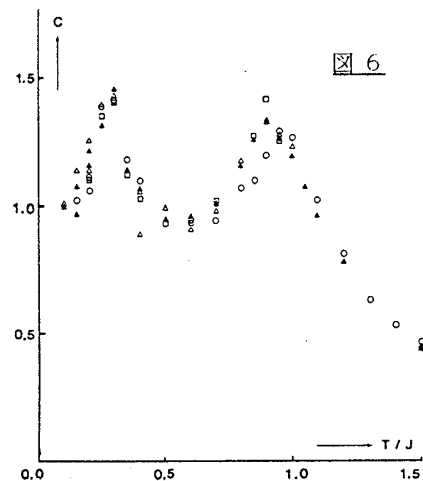


図6

の異方性依存性を図7に示す。 $T_{N1} < T < T_{N2}$ でのスピン配位は一軸的(collinear)なものであり $S_j^z \sim \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_j + \phi)$, $\vec{k} = (\pm 3\pi/4, 0)$ で表されるものと考えられる。ここで位相 ϕ は

2次元の強磁性XY模型の場合の低温相と同様にゆっくり変化する。 $T < T_{N2}$ では図1で示すようなnon-collinearな配位が現れるが、このことは $\vec{S}$ のxy成分を見ることによって知る事ができる(図8)。つまり T_{N1} は μ に関するKT転移であり、 T_{N2} は $\vec{S}$ のKT転移であるという事ができる。今の場合基底状態の配位が完全な 120° 構造ではないので磁化が少し残っている。そのため低温で一様磁場に対する応答に異常が見られる。 χ^{zz} はA型(1)、D型(2)ともに T_{N2} で発散し低温でのFerri的な性質を表している。次にxy-成分であるが図9に示すようにA型では低温で発散する。このことはz軸が容易軸であるにもかかわらず χ^{xx} あるいは χ^{yy} が発散するという事で大変特徴的なものであると考えられる。このような発散はD型ではみられない(但し、異方性が小さいときは少し非調な振舞いをみせる)。この発散はA型の基底状態に非自明な縮退があることに原因があることがわかった。つまりA型の基底状態では3つのスピンのうち1つは自由な向きに決められるという非自明の縮退が生じていることが簡単な計算でわかり、さらにそのまわりの調和的なゆらぎの自由度まで考えてもその縮退が解けないという事情にあることがわかった。この自由度のために打ち消しきらないで残っている磁化の向きがxy-成分を持ってよいことになり $T \sim 0$ ではそのため $\langle M_{xy}^2 \rangle$ が発散的に振舞うと考えられる。但し、 $T \neq 0$ では調和的以上の励起状態の自由度のために一軸性を回復していると考えられ低温相のスピン配位としてはやはり図1に与えたものであると考えてよいだろう。このような χ^{xx} などの低温での非自明な振舞いが実際の実験で観測されることを期待したい。

(IV) Ising模型

スピン1/2の場合のIsing系は厳密に解け有限温度では相転移がない²⁾。しかしながら連続スピン系のIsing模型(A型 $J_{xy} = 0$)は比熱に鋭い異常がみられる。このことは今のようなフラストレートした系においてはredundantな状態の存在が相転移の有無を左右する可能性を示唆している。 $S = 1$ のIsing系においてはほぼ $S = 1/2$ と同様な振舞がみられredundantな状態の存在の顕著な影響は見られなかったが¹¹⁾、最近 S を大きくするに伴い系統的にsublattice秩序が大きくなることがみいだされており¹⁴⁾これは今後の興味深い問題であろう。

図7

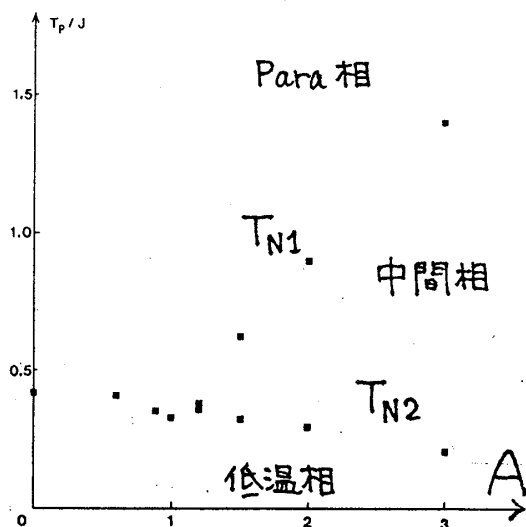
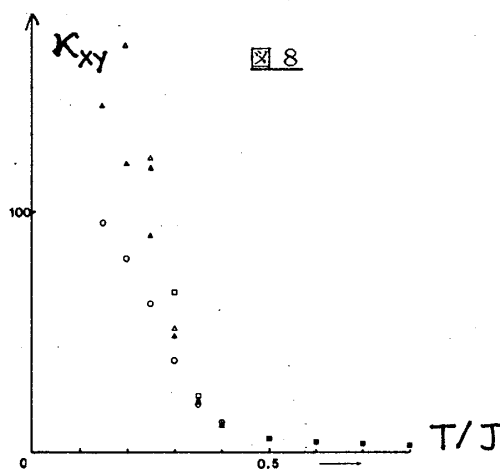
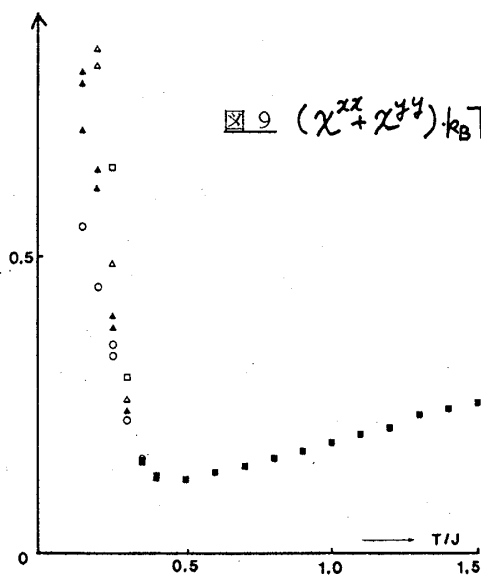


図8

図9 $(\chi^{xx} + \chi^{yy})/k_B T$ 

以上では最近接相互作用の場合を考えてきたが (III) で考えた系に第二近接相互作用を付加した場合について報告する¹⁵⁾。第二近接相互作用があると目片等によって指摘されたように z -成分の秩序構造が逐次的に相転移を起こすことが知られている⁴⁻⁵⁾。今の場合も最近接相互作用のみの場合は一種類だった z -成分の秩序がいわゆる部分無秩序型 (partially disordered相) と Ferri 型の 2 つにわかれそして更に低温側に non-collinear な相が現れることが平均場近似の解析によってわかった。

ここで考察した秩序変数の対称性と相転移についての表をあげておく：

スピンの 対称性	120° 構造の 対称性	κ の 対称性	トポロジカルな 欠陥 ¹³⁾	相転移の 特徴
XY XY-like	$Z_2 \times S_1$	Z_2	ドメイン壁, $\Pi_0(Z_2)$ vortex, $\Pi_1(S_1)$	比熱の対数発散。 自発カイラリティ。 $J_{\text{eff}}(T)$ の KT 的振舞。
Heisenberg Ising-like	P_3 $Z_6 \times S_1$	S_2 S_1	Z_2 -vortex, $\Pi_1(P_3)$ 実効的な vortex vortex, $\Pi_1(S_1)$	Z_2 -vortex の解離。 z -成分、 xy -成分 の逐次的相転移。
Ising-like A タイプ、 $T=0$	$S_1 \times S_1$	S_1	vortex, $\Pi_1(S_1)$ vortex, $\Pi_1(S_1)$	xy -成分の異常な振舞。
Ising	--	--	---	比熱に鋭いピーク。
Ising+	--	--	実効的な vortex	z -成分の逐次相転移。
第二近接相互作用			ドメイン壁	
Ising-like+	$Z_1 \times S_1$	S_1	実効的な vortex	z -成分の逐次相転移と
第二近接相互作用			ドメイン壁 vortex, $\Pi_1(S_1)$	xy -成分の相転移。

表の notation については文献 13) 参照

最後に磁場中での振舞いについて触れる。

これまで AFT の磁場中の振舞いについては Ising⁵⁾, XY⁸⁾

及び Heisenberg 系¹⁸⁾ で調べられており図 10 のような相図が求まっている。また XY と Heisenberg 系での磁化曲線 $M_z(H_z)$ は $M_z = H_z / 9J$, $H_z < 9J$ 、と完全に直線的なものであった。しかしながら Ising-like Heisenberg 系では¹⁷⁾ Ising 系の特徴も残しており磁化曲線は図 11 のようになる。またこの第 3 相 (図 11c) では磁化の横成分が出現しそのため XY 面内の磁氣的振舞に異常が生じる。このことはこれまでの系にはなかったことで、このような非自明な自由度の出現に関する現象が実験的にも観測されることが期待される。また $H \rightarrow 0$ での Ferri 成分はスピン 1/2 の量子スピン系では消失することが有限サイズの系でみいだされており¹⁸⁾ この場合の磁化曲線への量子効果も興味深い問題である。

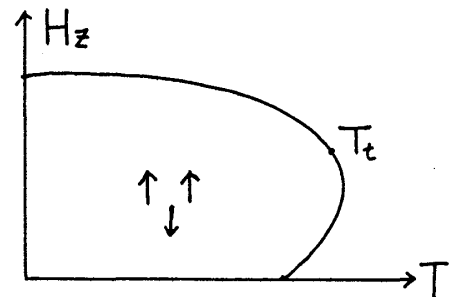


図 10a Ising

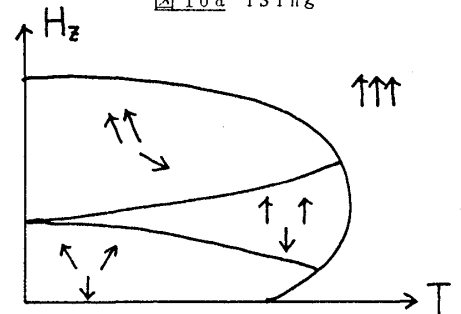


図 10b XY & Heisenberg

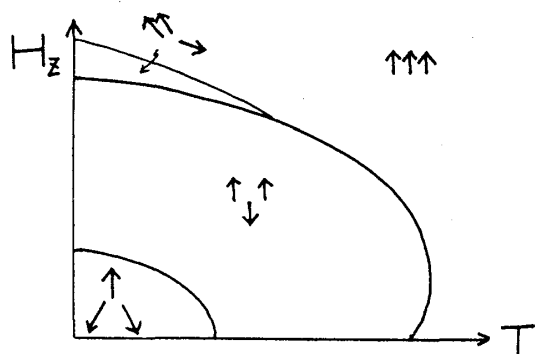


図10c Ising-like A 型

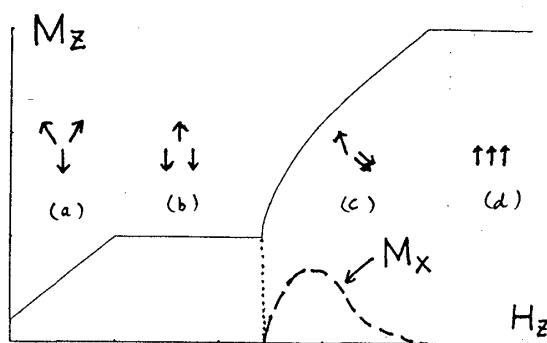


図11

参考文献

- 1) G.Toulouse: Commun. Phys. 2(1977)115; J.Villain: J. Phys. C10(1977)1717.
- 2) G.M.Wannier: Phys. Rev. 79(1950)357 & B7(1973)5017; R.M.F.Houtappel: Physica 16(1950)425; K.Hushimi & I.Syoz: Prog. Theor. Phys. 5(1950)177 & 341.
- 3) S.Alexander & P.Pincus: J. Phys. A13(1980)263;
S.Miyashita: in Topological Disorder in Condensed Matter, P.191 ed. by F.Yonezawa & T.Ninomiya(Springer-Verlag 1983)及びその中の文献
- 4) M.Mekata: J. Phys. Soc. Jpn 42(1977)76; S.Fujiki, K.Shutoh, Y.Abe & S. Katsura: ibid. 52(1983)1531; H.Takayama, K.Matsumoto & K.Wada: ibid. 52(1983)2888.
- 5) B.Mihura & D.P.Landau: Phys. Rev. Lett. 38(1977)977;
D.P.Landau: Phys. Rev. B27(1983) 5604.
- 6) S.Teitel & C.Jayaprakash: Phys. Rev. B27(1983)598.
- 7) S.Miyashita & H.Shiba: J. Phys. Soc.Jpn. 53(1984) 1145
- 8) D.H.Lee, J.D.Joannopoulos, J.W.Negel & D.P.Landau: Phys. Rev. Lett. 52(1984)433;
H.Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. 53(1984) 2452.
- 9) Vic.S.Dotzenko & G.V.Uimin: J. Phys. C18(1985)5019; M.Yosefin & E.Domany: Phys. Rev. B32(1985)1778; B.Berge, H.T.Diep, A.Ghazali & P.Lallemand:preprint;
D.H.Lee, J.D. Joannopoulos, J.W.Negel & D.P.Landau: Phys. Rev. B33(1986)450.
- 10)H.Kawamura & S.Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. 53(1984)9 & 4113.
- 11)S.Miyashita & H.Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. 54(1985)3385.
- 12)J.M.Kosterlitz & D.J.Thouless: J. Phys. C6(1973)1181 & C7(1974)1946.
T.Ohta and D.Jasnow: Phys. Rev. B20(1979)139.
- 13)N.D.Mermin: Rev. Mod. Phys. 51(1979)591;
G.Toulouse & M.Kleman: J. Phys. Lett.(France) 37(1976)149.
- 14)永井旺二郎 私信
- 15)S.Miyashita: J.P.S.J. 55(1986) 227.
- 16)H.Kawamura & S. Miyashita: J.P.S.J. 54(1984)4530.
- 17)S.Miyashita: 準備中.
- 18)H.Nishimori & S.Miyashita: 準備中.